

UNIVERZA V LJUBLJANI  
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO  
ODDELEK ZA FIZIKO

VIŠJE RAČUNSKE METODE  
**8. naloga: Matrično produktni nastavki**

Žiga Šinigoj, 28222025

Ljubljana, maj 2023

# 1 Uvod

Mnogodelčno stanje  $n$  spinov  $|\psi\rangle$  lahko zapišemo po bazi kot

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_n} \psi_{s_1, s_2, \dots, s_n} |s_1 \dots s_n\rangle, \quad (1)$$

kjer je  $s_i$  dimenzije  $d$ . Za primer Heisenbergove verige je  $d = 2$ . Koeficiente razvoja lahko zapišemo kot produkt matrik

$$\psi_{s_1, s_2, \dots, s_n} = A_{s_1}^{(1)} A_{s_2}^{(2)} \dots A_{s_n}^{(n)}. \quad (2)$$

Matrike dobimo s pomočjo SVD razcepa po naslednjem postopku:

- Vektor koeficientov zapišemo kot matriko dimenzije  $d \times d^{n-1}$  in naredimo SVD razcep

$$\psi_{s_1, (s_2 \dots s_n)} = \sum_{k_1} U_{(s_1, k_1)}^{(1)} \lambda_{k_1}^{(1)} V_{k_1, (s_2 \dots s_n)}^{(1)\dagger}, \quad (3)$$

in definiramo  $(A_{s_1}^{(1)})_{k_1} = U_{(s_1, k_1)}^{(1)}$  in  $\psi_{s_2 \dots s_n}^{(2)} = \lambda_{k_1}^{(1)} V_{k_1, (s_2 \dots s_n)}^{(1)\dagger}$

- Za splošni korak velja

$$\psi_{(k_{j-1}, s_j), (s_{j+1} \dots s_n)}^{(j)} = \sum_{k_j} U_{(k_{j-1}, s_j), k_j}^{(j)} \lambda_{k_j}^{(j)} V_{k_j, (s_{j+1} \dots s_n)}^{(j)\dagger}, \quad (4)$$

in  $(A_{s_j}^{(j)})_{k_{j-1}, k_j} = U_{(k_{j-1}, s_j), k_j}^{(j)}$  in  $\psi_{k_j, s_{j+1} \dots s_n}^{(j+1)} = \lambda_{k_j}^{(j)} V_{k_j, (s_{j+1} \dots s_n)}^{(j)\dagger}$ .

- V zadnjem koraku definiramo še

$$(A_{s_n}^{(n)})_{k_{n-1}} = \psi_{k_{n-1}, s_n}^{(n)} \quad (5)$$

## 2 Reševanje naloge

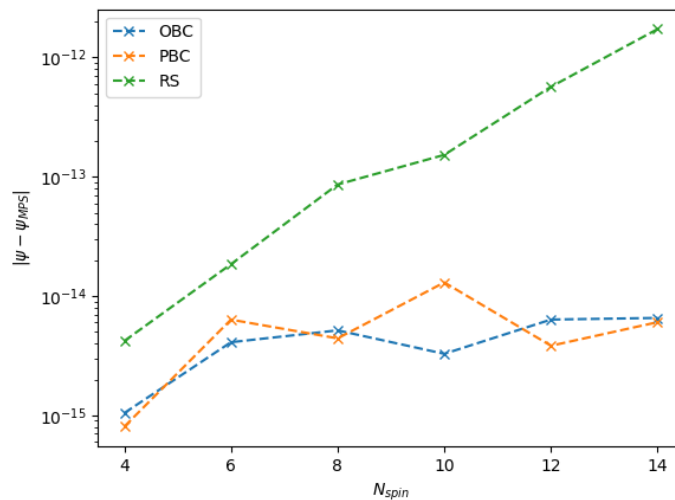
Računanje sem opravil v C++, grafe pa v Pythonu. Najprej sem moral zapisati Hamiltonijan iz 4. naloge kot matriko, da sem lahko dobil osnovno stanje. To sem naredil s tenzorskimi produkti in diagonalizacijo. Pri tem sem uporabil paket *Sparse*, naj bi bil namenjen diagonalizaciji velikih sistemov. Težava je bil seveda pomnilnik, saj ga ni bilo dovolj, da bi poračunal Hamiltonijan za 14 spinov. En način bi bil lociranje pomnilnika na trdem disku, drugi pa je konstrukcija 'sparse' matrike. To sem dobil na način, da apliciral Hamiltonijan (lokalno) na vsako bazno stanje in tako dobil vektor v matriki Hamiltonijana. Iz tega sem potem skonstruiral 'sparse' matriko, in jo nato s primernimi algoritmi diagonaliziral. Najnižja lastna vrednost pripada osnovnemu stanju sistema. Ta način je približno 10 krat počasnejši kot tenzorski produkt, vendar pa ne zasede toliko spomina in bi ga bilo s parallelizacijo mogoče pohitriti za nekaj manj kot faktor števila jeder računalnika. V nalogi nas zanima predvsem entropija prepletenosti podsistemov. Entropijo prepletenosti podsistema dobimo prek SVD razcepa matrike  $\langle s_A s_B | \psi \rangle$ , kjer sta A in B željena podsistema. Več informacij dobimo, če uporabimo zgornji algoritem, saj nam da entropije prepletenosti vseh možnih kombinacij velikosti podsistemov A in B. V primeru nekompaktnih bi-particij sem se lotil problema tako, da sem mesto danega koeficienta v vektorju koeficientov  $\psi_{s_1, s_2, \dots, s_n}$  pretvoril v binarno število in potem iskane bite podsistema A združil in pretvoril v decimalno število. Enako sem naredil za bite podsistema B. Tako sem dobil mesto v matriki, ki ima vrednost danega koeficienta. Potem sem napravil SVD razcep in izračunal entropijo prepletenosti kot

$$S = - \sum_{k=1}^{M_j} |\lambda_k^{(j)}|^2 \log |\lambda_k^{(j)}|^2. \quad (6)$$

Poskusil sem dobiti entropijo prepletenosti z MPS razcepom nekompaktne bi-particije, vendar nisem dobil enakih rezultatov. Poskusil sem za vsako bazno stanje (vsak koeficient) predstaviti bite podsistema A na eno stran in bite podsistema B na drugo stran in pretvoriti novo binarno število v decimalni zapis. Na ta način sem dobil mesto v vektorju, kamor sem postavil dani koeficient. Nato sem naredil MPS razcep na takem stanju. Mogoče sem kaj narobe implementiral, ali pa ni mogoče na ta način dobiti entropije prepletenosti za simetrično nekompaktno bipartitijo.

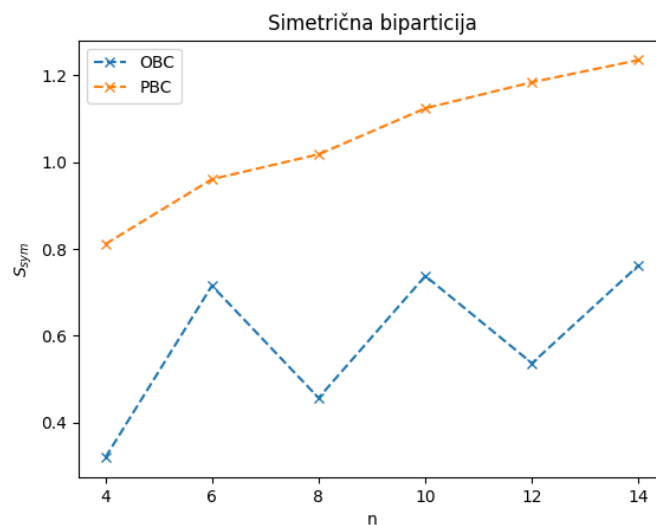
### 3 Rezultati

Osnovno stanje Heisenbergove verige s periodičnimi in prostimi robnimi pogoji je na grafih označeno kot PBC in OBC. Naključno normirano stanje, porazdeljeno po enakomerni porazdelitvi, je označeno kot RS. Najprej sem preveril delovanje MPS algoritma (slika 1). To sem naredil tako, da sem zmnožil pravilne podmatrike matrik  $(A_{s_j}^{(j)})_{k_{j-1}, k_j}$ , odvisno od stanja spina na  $j$ -tem mestu, in tako dobil iskani vektor koeficientov. Nato sem pogledal razliko med vektorjem koeficientov in rekonstruiranim vektorjem. Vidimo lahko, da je algoritem zelo natančen. Napaka se večja z večanjem sistema in je tudi odvisna od stanja. Pri naključnem stanju napaka raste bistveno hitreje kot pri osnovnih stanjih Heisenbergovega modela.



Slika 1: Odstopanje rekonstruiranega stanja od pravega stanja sistema po drugi normi v odvisnosti od velikosti sistema spinov.

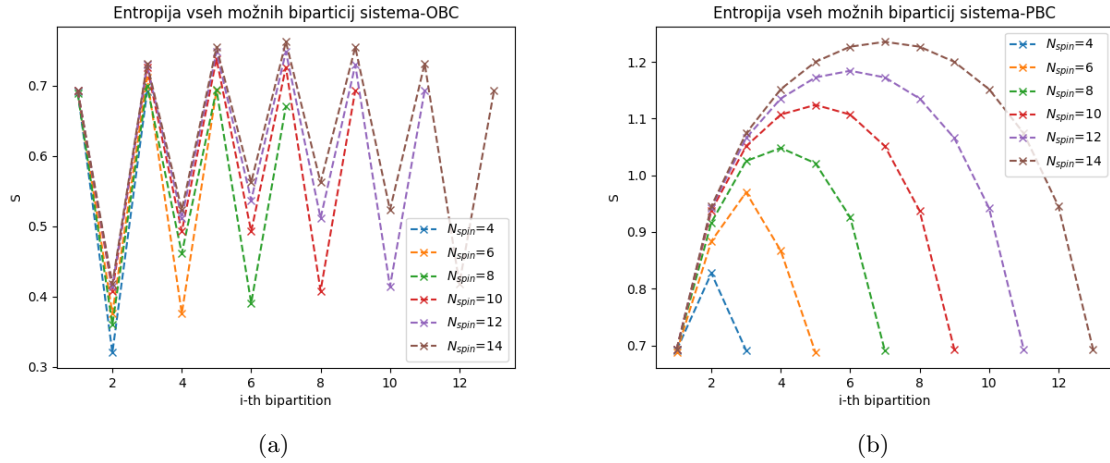
Entropijo prepletenosti v odvisnosti od dolžine verige, kjer v vsak podsistem A in B damo enako število spinov (prvo polovico v A, drugo v B) za osnovno stanje Heisenbergovega modela prikazuje slika 2. V primeru periodičnih robnih pogojev entropija monotonno narašča, v primeru odprtih robnih pogojev pa dobimo nekakšne oscilacije. Ker nam MPS dekompozicija da vse ostale entropije, sem pogledal še entropije vseh možnih biparticij za PBC, OBC in RS (slika 3 in 4). Entropija v primeru odprtih robnih pogojev oscilira za vse možne bi-particije. Ko sta sistema enako velika, doseže entropija maksimalno vrednost. V



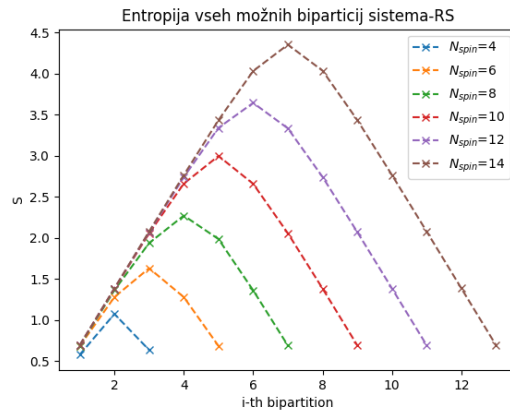
Slika 2: Entropija prepletenosti v odvisnosti od velikosti spinske verige ( $n$ ) za simetrično kompaktno bipartitijo.

primeru naključnega stanja, ki je sestavljeno iz vektorja kompleksnih koeficientov, pa dobimo odvisnost, ki

se skoraj sklada s teorijo. Naključno stanje je teoretično maksimalno prepleteno, in bi v teoriji moral dobiti obliko periode trikotnega vala. To dobim samo za  $N_{spin} = 4$ , za ostale pa se pri vrhu krivulja rahlo zakrivi. Entropija je največja za naključno stanje, za Heisenbergov model pa je večja v primeru periodičnih robnih pogojev.



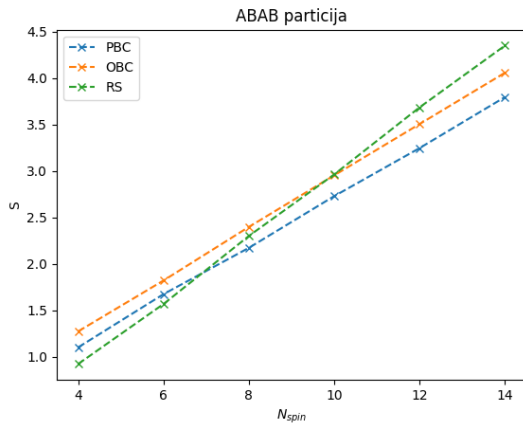
Slika 3: a) Entropija bi-particij pri različnih velikostih spinske verige in odprtih robnih pogojih. b) Entropija bi-particij pri različnih velikostih spinske verige in periodičnih robnih pogojih.



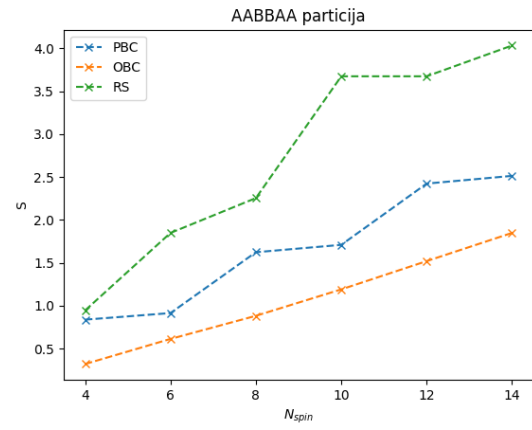
Slika 4: Entropija bi-particij na naključnem stanju spinske verige.

### 3.1 Nekompaktne bi-particije

Pogledal sem entropijo za 2 nekompaktni biparticiji. Najprej za primer, ko bi-particiji A pripada vsak drugi spin in podobno za bi-particijo B. Odvisnost od velikosti sistema prikazuje slika 6a. Entropija za periodične robne pogoje nima več oscilacij in je tudi manjša od entropije pri odprtih robnih pogojih. Entropija naključnega stanja narašča hitreje kot entropija osnovnega stanja Heisenbergovega modela, kar je pričakovano. Kot drugo nekompaktno bi-particijo sem vzel pare zaporednih spinov (AABBAABBAA...). Odvisnost entropije prikazuje slika 6b. V tem primeru pa je entropija pri periodičnih robnih pogojih večja od entropije pri odprtih robnih pogojih. Pogledal sem še odvisnost entropije prepletenosti pri naključnem stanju za različne biparticije (slika 6). Pričakoval bi, da bo entropija neodvisna od načina razreza podsistema, saj je stanje naključno. Iz odvisnosti bi lahko sklepal da to drži, saj je približno enaka odvisnost za kompaktno bi-particijo in ABABAB bi-particijo. Pri AABBAAB biparticiji pa se na mestih, ko lahko simetrično razdelim podsistema entropija ujema z kompaktno in ABABA. Na mestih kjer ni mogoče simetrično razdeliti podsistema, pa je nekoliko manjša, saj ni bilo mogoče doseči maksimalne entropije, ki bi najverjetneje bila enaka kot za kompaktno in ABABA bi-particijo.

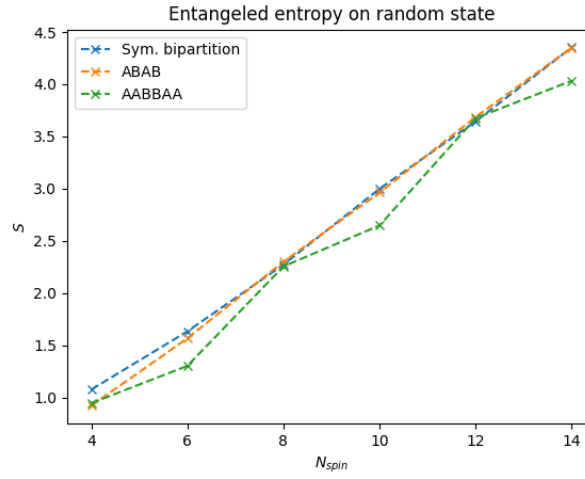


(a)



(b)

Slika 5: a) Entropija pri ABAB bi-particiji v odvisnosti od velikosti spinske verige. b) Entropija pri AABBAA bi-particiji v odvisnosti od velikosti spinske verige.



Slika 6: Entropija naključnega stanja pri različnih biparticijah v odvisnosti od velikosti spinske verige.